Autoreferat

1. Imię i nazwisko

Maciej Matyka

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe/ artystyczne

Doktorat z nauk fizycznych, Instytut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki i Astronomii UWr.
Temat: Modelowanie numeryczne transportu płynów przez ośrodki porowate.
Data uzyskania: 2009-04-03
Promotor: **dr hab. Zbigniew Koza**

Magisterium, Instytut Fizyki Teoretycznej, Wydział Fizyki i Astronomii UWr.
Temat: Badanie zjawisk zachodzących w cieczach nieściśliwych metodą cząstek znaczonych.
Data uzyskania: 2005-01
Promotor: **dr hab. Janusz Szwabiński**

3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu

Od 2009 pracuję jako **adiunkt na Uniwersytecie Wrocławskim**, Wydział Fizyki i Astronomii, Instytut Fizyki Teoretycznej, pl. M. Borna 9, Wrocław.

4. Osiągnięcie naukowe

Zbadanie struktury i pól prędkości w przepływie przez układy o nieregularnej budowie.

5. Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego:

H-1 *Koza, Z.*, Matyka, M. and *Khalili, A.*, Finite-size anisotropy in statistically uniform porous media
Phys. Rev. E 79, 066306 (2009)

H-2 *Malecha, Z.*, *Miroslaw, L.*, *Tomczak, T.*, *Koza, Z.*, Matyka, M., Tarnawski, W., Szczerba, D., GPU-based simulation of 3D blood flow in abdominal aorta using OpenFOAM
Arch. Mech. Vol. 63 No. 2 pp. 137-161 (2011)

H-3 *Duda,* A., *Koza, Z.* and Matyka, M., Hydraulic tortuosity in arbitrary porous media flow, Phys. Rev. E 84, 036319 (2011)

H-4 Matyka, M., *Koza, Z.*, *Miroslaw, L.*, Wall Orientation and Shear Stress in the Lattice Boltzmann Model
Computers & Fluids, 73 (2013), 115-123

H-5 Matyka, M., *Koza, Z., Gołembiewski,* J., *Kostur, M.*, *Januszewski, M.*, Anisotropy of flow in stochastically generated porous media,
Phys. Rev. E 88, 023018 (2013)

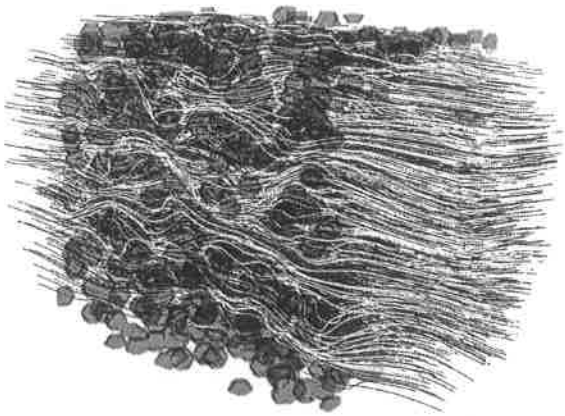
H-6 *Khalili, A., Morad, M. R.*, Matyka, M., Liu, B., *Malekmohammadi, R.*, *Weise, J.*, Kuypers, M. M. M. , Porosity variation below a fluid-porous interface
Chemical Engineering Science, 107, pp. 311-316 (2014)

H-7 M. Matyka, *J. Golembiewski*, *Z. Koza*, Power exponential velocity distributions in disordered porous media
Phys. Rev. E 93, 013110 (2016)

H-8 *Matyka, M. and Koza, Z.*, How to Calculate Tortuosity Easily?, AIP Conf. Proc. 1453, 17-22 (2012)

6. Opis

Ośrodki fizyczne o budowie nieregularnej złożonej z przepuszczalnych i nieprzepuszczalnych elementów w różnym stopniu pomieszanych ze sobą są wszechobecne w naturze - gleba, skały, wszelkie materiały sypkie (granulaty), płuca, nerki, różne filtry, układ krwionośny itp. Transport płynów przez te ośrodki jest badany w kontekście różnych nauk: począwszy od fizyki i fundamentalnych praw rządzących przepływem (równania Naviera-Stokesa, prawa Darcy'ego, Forchheimera) [Andrade99], geologii [Dardis98, Berg13], aż po biologię [Zacarias05] i medycynę [Nouguchi05]. W ogólności ośrodki o budowie złożonej ze szkieletu wypełnionego pustymi przestrzeniami nazywamy ośrodkami porowatymi. W kontekście badań nad transportem płynów przez takie ośrodki bada się m. in. przepuszczalność skał i gleb, również w zastosowaniach w przemyśle wydobywczym (np. gazy łupkowe) [Zhao16], transport krwi przez naczynia krwionośne [Nouguchi05], zjawiska filtracji [Araújo06], czy nawet w naturalnych procesach cyrkulacji materii w przyrodzie [Gao12].

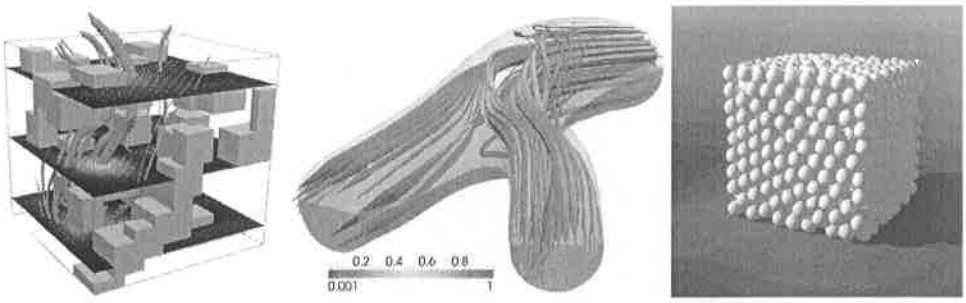


Rys. 1. Przepływ przez trójwymiarowy model ośrodka porowatego zbudowanego ze sztywnych przeszkód rozmieszczonych losowo w przestrzeni (linie prądu) [Matyka14].

Jednym z centralnych problemów dotyczących transportu płynów przez ośrodki o budowie porowatej jest trudność w przeprowadzaniu badań eksperymentalnych. Pory są zwykle bardzo małe w porównaniu do skali ośrodka, jest ich bardzo dużo, mają skomplikowaną budowę i nieregularne brzegi (Rys. 1). Przesiąkanie płynu przez próbki porowate jest zjawiskiem opisywanym zarówno na poziomie mikroskopowym (skala pojedynczych porów), jak i makroskopowym (skala próbki). W obu przypadkach zbadanie prędkości przepływu, przepuszczalności czy krętości jest utrudnione przez specyficzną budowę, skalę badań oraz własności mechaniczne materiału.

Dlatego tak ważna jest umiejętność przeprowadzania badań numerycznych nad transportem przez ośrodki porowate. Moja praca polegała na badaniu praw podstawowych, zjawisk fizycznych, ich analizie i opisie z użyciem narzędzi numerycznych, symulacji oraz analizy teoretycznej i modelowaniu. Zająłem się zagadnieniami związanymi z trzema klasami ośrodków o skomplikowanej budowie:

A) ośrodki o budowie losowo rozmieszczonych przeszkód **[H-1, H-3, H-5, H-7, H-8]**
B) ośrodki o budowie rzeczywistej (fragment układu krwionośnego) **[H-2, H-4]**
C) ośrodki o budowie ziarnistej **[H-6]**



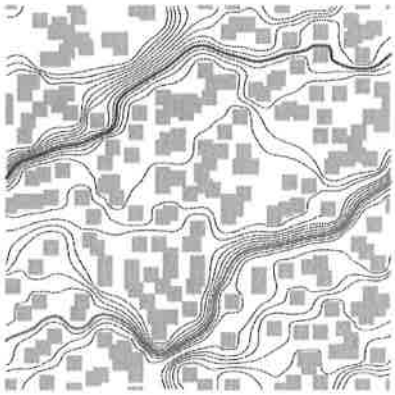
Rys. 2. Trzy typy ośrodków o budowie złożonej, które badałem w swoich pracach: A) losowo rozmieszczone przeszkody np. [H-4], B) fragment układu krwionośnego np. [H-2] oraz C) układ upakowanych kul w sztywnym zbiorniku np. [H-6].

W swoich pracach zbadałem m. in.: anizotropię próbek i kryterium jej zanikania (A), strukturę naprężeń na ścianach naczyniowych (B), krętość ośrodków losowych w dużej skali (A), strukturę powierzchni próbek (C), funkcję rozkładu prędkości (A). Badania w dużej części mają charakter numerycznych eksperymentów nad transportem i prowadzą do nowych obserwacji, wniosków oraz hipotez, które w szczegółach opiszę dalej.

Anizotropia w ośrodkach losowych

Prace wchodzące w skład tej części osiągnięcia naukowego: **[H-1, H-5].**

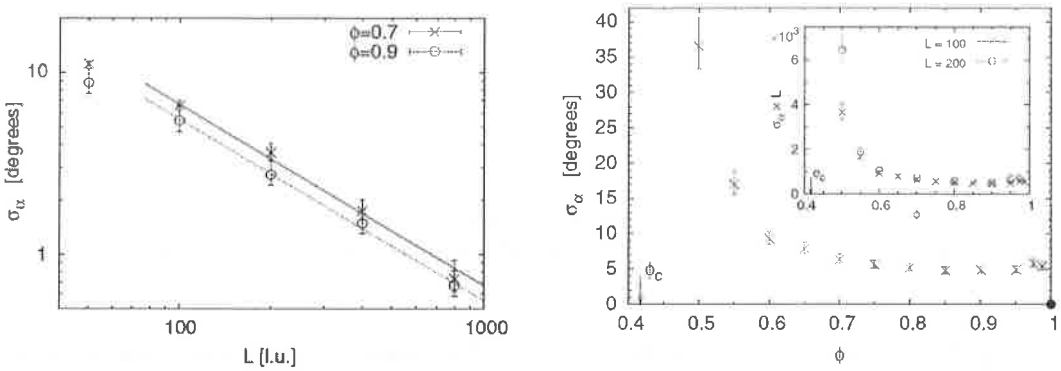
Pracę nad anizotropią rozpocząłem od badań nad dwuwymiarowym ośrodkiem porowatym złożonym z losowo pokrywających się, nieprzepuszczalnych przeszkód o kształcie kwadratowym **[H-1]**. Celem naukowym było opracowanie wygodnego kryterium na minimalny stosunek L/a (wielkości próbki do wielkości pojedynczego ziarna) przy którym efekty skończonego rozmiaru modelu przestają mieć wpływ na uzyskane wyniki w tym specyficznym modelu ośrodka porowatego (Rys. 3).



Rys. 3. Linie prądu w przepływie przez okresową próbkę porowatą złożoną z pokrywających się przeszkód o kształcie kwadratowym w dwóch wymiarach przy zewnętrznej sile wymuszającej przepływ skierowanej poziomo. Próbka o porowatości 0.7 wykazuje silną anizotropię związaną z nachyleniem makroskopowego kierunku

przepływu (tu widocznego gołym okiem jako nachylenie pojedynczych linii prądu względem poziomo skierowanej zewnętrznej siły) **[H-1]**.

Przeprowadziłem szereg symulacji komputerowych przepływu z użyciem metody gazu sieciowego Boltzmanna (LBM). Badania symetryczności tensora przepuszczalności oraz nachylenia linii prądu w przepływie przez setki różnych, losowych, próbek badania wykazały, że pierwiastek ze średniej wartości kwadratu kąta nachylenia wszystkich wygenerowanych linii prądu staje się zaniedbywalnie mały dla wartości L/a≈100 (Rys. 4).



Rys 4. (lewy) Wykres prezentujący zanikanie anizotropii wraz ze zwiększającym się rozmiarem liniowym układu (przy stałym rozmiarze pojedynczej przeszkody). (prawy) Anizotropia w ośrodkach o zmiennej porowatości, gdzie widać prawdopodobnie efekty skończonego rozmiaru dla wyższych porowatości (anizotropia nie zanika do wartości 0 jak wynosi wartość teoretyczna dla φ=1) **[H-1]**.

Rozwinięciem badań nad anizotropią była praca z 2013 roku, gdzie cały aparat teoretyczno-numeryczny został rozwinięty do badań trójwymiarowych (Rys 2. A) **[H-5]**. Symulacje i obliczenia anizotropii zostały opracowane z założeniem, że w układzie spełnione jest empiryczne prawo Darcy'egpo:

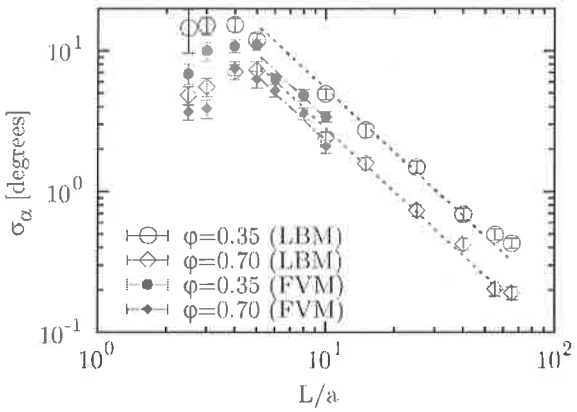
$$\mathbf{q} = -\hat{\mathbf{K}}(\nabla P - \rho \mathbf{g}),$$

gdzie q jest strumieniem przepłuwu, K jest tensorem przepuszczalności, ∇P to gradient ciśnienia, ρ - gęstość płynu, a **g** - przyspieszenie ziemskie. W pracy tej badaliśmy i udowodniliśmy m. in. wcześniejszą hipotezę, wedle której zachodzi empiryczny wzór na skalowanie anizotropii wraz z rozmiarem układu [H-1,H-4]:

$$\sigma_\alpha \propto L^{-\delta}, \quad \delta = d/2,$$

gdzie σ jest pierwiastkiem ze średniej wartości kwadratu kąta nachylenia linii prądu, L jest rozmiarem liniowym układu, a δ w wykładniku jest stałą zależną od wymiaru (d) układu. Z użyciem dwóch niezależnych metod numerycznych (LBM oraz OpenFOAM z użyciem symulacji opartych o metodę Finite Volume Method FVM, wykonanych

przez m. in. mojego doktoranta) pokazaliśmy, że ww relacja skalowania anizotropii zachodzi również w przypadku trójwymiarowym (Rys. 5).



Rys. 5. Skalowanie anizotropii z rozmiarem układu (L/a) przy stałym a. Anizotropia zanika (średni kąt ~1 stopień) dla L/a = 10. Wyniki numeryczne z symulacji komputerowych przepływu **[H-4]**.

W naszych badaniach wykazaliśmy, że w trzech wymiarach wymagania na rozmiar układu (względem anizotropii) są o rząd mniejsze niż w układach dwuwymiarowych (wykazaliśmy warunek L/a=100 dla 2D i L/a=10 dla 3D).

Jedną z hipotez badanych w tej pracy była także próba wykazania, że w układzie ze sztywnymi brzegami musi istnieć dodatkowy gradient ciśnienia wywierany przez płyn na ścianki naczynia, który związany jest bezpośrednio z anizotropią układu. W naszej pracy opisaliśmy zależność tego gradientu od L/a. Przeprowadziliśmy również badania nad anizotropią składowej Kxx tensora przepuszczalności i wykazaliśmy zależność tej wielkości od stosunku L/a nawet dla dużych wartości tego stosunku.

Badania w tym projekcie wymagały obliczeń dużej skali na wielu próbkach losowych, dlatego wykorzystaliśmy procedury i kody numeryczne pracujące m. in. w środowisku GPU (biblioteka numeryczna SAILFISH z Uniwersytetu Śląskiego, *http://sailfish.us.edu.pl/*) z wykorzystaniem infrastruktury i grantów obliczeniowych PL-GRID.

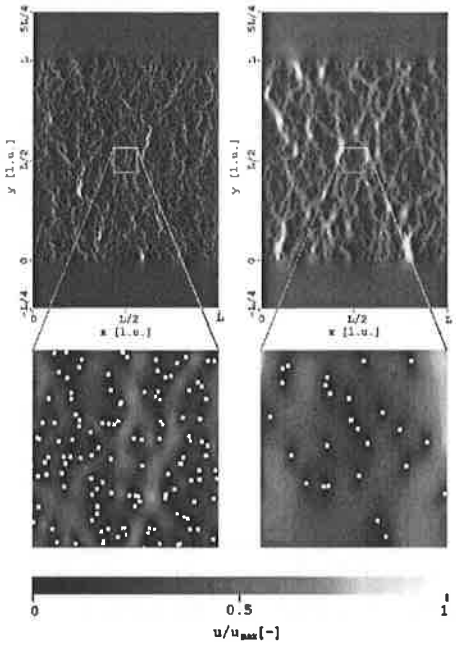
Krętość hydrauliczna

Prace wchodzące w skład tej części osiągnięcia naukowego: **[H-3, H-8].**

Celem kolejnej pracy było zbadanie krętości i weryfikacja wyprowadzonej teorii czyli analitycznego wzoru na krętość wyprowadzonego przez przez dra A. Dudę (współautor publikacji).

Ze względu na charakter dotychczasowych badań (obliczenia numeryczne) oraz na silną zależność wyników od rozmiarów układów pojawiła się potrzeba przebadania układów o dużym rozmiarze. Swoją kolejną pracę [H-3] rozpocząłem od opracowania

koncepcji na badania krętości hydraulicznej (średniego wydłużenia trajektorii cząsteczek płynu przepływających przez ośrodek porowaty) w układach dwuwymiarowego ośrodka porowatego w dużej skali. Przygotowałem skrypty z opisem doświadczeń numerycznych z użyciem biblioteki Palabos (www.palabos.org). Ta biblioteka pozwala m. in. na uruchomienie symulacji w środowisku równoległym z użyciem protokołu MPI (Message Passing Interface). Przykładowe, stacjonarne pole prędkości przedstawione zostało na Rys. 6.



Rys. 6. Pola prędkości w przepływie przez ośrodek porowaty zbudowany z pokrywających się kwadratów o boku a=10l.u. (jednostek sieci). Cały układ ma tu rozmiar L=4000l.u., co daje L/a=400 (dużo powyżej granicy anizotropii wykazanej w **[H-1]***). Dane pochodzą z pracy* **[H-3]**.

W naszych dotychczasowych badaniach nad krętością [Matyka08] używaliśmy wzoru na średnią długości linii prądu, który pozwalał na wyznaczenie tej wielkości z pola prędkości **[H-3]:**

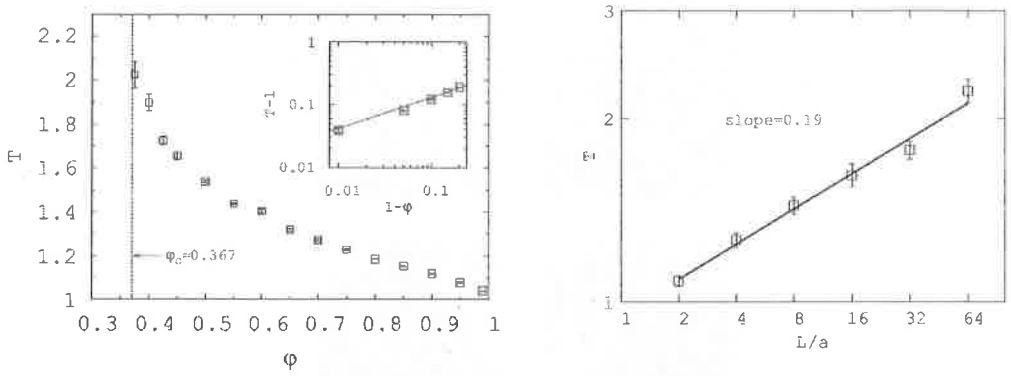
$$\tau^{*} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \lambda(i)$$

W tej pracy jedną udowodniliśmy hipotezę, że nasza relacja jest zgodna z wzorem na krętość w którym wystarczy uśrednić pole prędkości i podzielić przez średnią ze składowych prędkości w kierunku makroskopowego przepływu:

$$T^{\mathrm{M}} = \frac{\langle v \rangle}{\langle v_x \rangle}$$

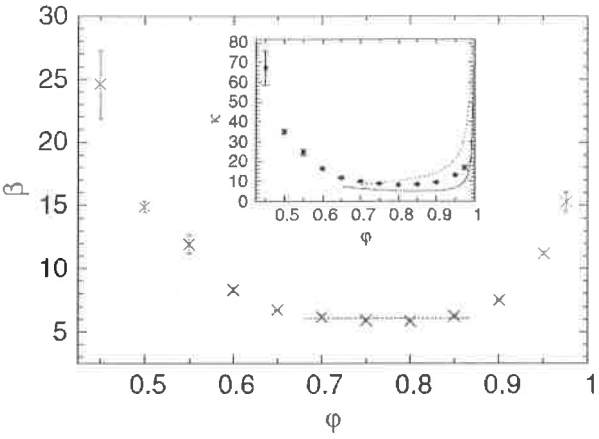
gdzie <v> jest średnią prędkością, a <vx> średnią składową 'x' prędkości po całym obszarze w którym występuje płyn.

Po przeprowadzeniu szeregu symulacji przepływu przez układy o różnej porowatości udało nam się pokazać, że krętość rośnie z malejącą porowatością od wartości ok. T=1 dla porowatości 1 do około T=2 dla wartości porowatości blisko progu perkolacji (która wynosi pc=0.367). Dzięki użyciu procedur równoległych mogliśmy znacznie rozszerzyć swoje wcześniejsze wnioski [Matyka08] m. in. przeprowadziliśmy analizę skalowania krętości wraz ze stosunkiem L/a rozmiaru układu do wielkości ziarna (Rys. 7).



Rys. 7. (lewy) Zależność krętości od porowatości wyznaczona wzorem udowodnionym w **[H-3]**. *(prawy) Skalowanie krętości wraz z rozmiarem próbki L/a, wykres podwójnie logarytmiczny, zależność potęgowa.*

Końcowym zadaniem w tej części naszej pracy była próba wyznaczenia współczynnika kształtu (shape factor) w równaniu empirycznym Kozeny'ego-Carmana z uwzględnieniem wyznaczonej przez nas numerycznej krętości. Okazało się, że nasze badania prowadzą do wniosku, że w przypadku dwuwymiarowym współczynnik kształtu (β w równaniu 1 z **[H-3]**) jest stały jedynie w zakresie porowatości p=0.7-0.85 (Rys. 8).



Rys. 8. Współczynnik kształtu z równania Kozeny'ego-Carmana **[H-3]** *w zależności od porowatości układu. Zarówno układy o zbyt wysokiej jak i zbyt niskiej porowatości nie są dobrze opisywane przez to prawo.*

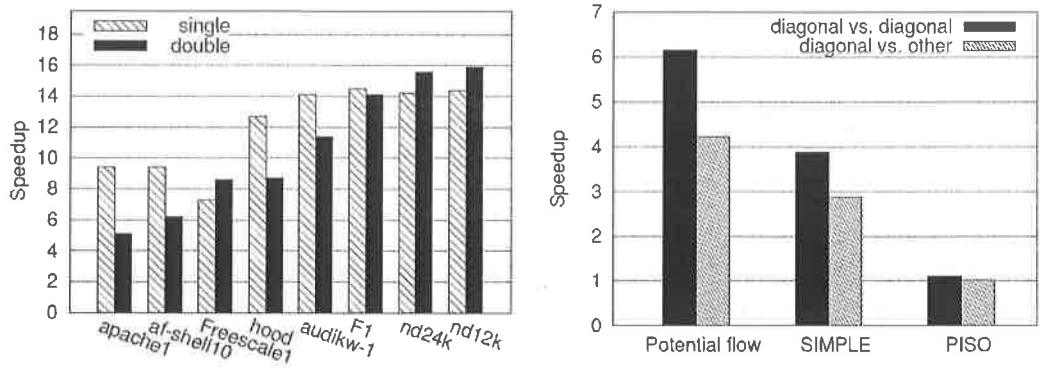
W trakcie pracy nad krętością ośrodków losowych wystąpiłem na konferencji *4th International Conference on Porous Media and its Applications in Science, Engineering and Industry An ECI Conference Series, Poczdam, Niemcy, (2012),* gdzie w ramach plenarcnego wykładu otwarcia zaprezentowałem nasze wyniki. W ramach tej pracy zbadałem i porównałem krętości hydrauliczną i geometryczną w układach dwuwymiarowych (kanały). Zbadałem tu również korelacje pomiędzy krętością, a porowatością w układach dwu- i trójwymiarowych przeszkód (dyski i kule) **[H-8]**.

Transport przez układy o budowie złożonej pochodzące z tkanek naturalnych
Prace wchodzące w skład tej części osiągnięcia naukowego: **[H-2, H-4]**

Badania nad ośrodkami o budowie porowatej nie muszą się ograniczać do modeli abstrakcyjnych zbudowanych z pokrywających się przeszkód. Kolejnym krokiem w mojej pracy nad przepływami były badaniach było zbadanie ośrodków o budowie naturalnej, a konkretnie przez fragment układu krwionośnego człowieka.

Moja praca podzielona była na dwa etapy. Najpierw współtworzyłem procedury numeryczne potrzebne do przyspieszenia obliczeń na kartach graficznych (Graphics Processing Units - GPU). W tym celu zaimplementowane zostały podstawowe formaty zapisu macierzy rzadkich w pamięci procesorów GPU, oraz procedury ich mnożenia przez wektory. Dzięki temu znacznie przyspieszone zostały podstawowe składowe standardowych metod komputerowej dynamiki płynów. Następnie, moi współpracownicy użyli tych cegiełek do przyspieszenia biblioteki OpenFOAM. Nasze badania polegały na przeprowadzeniu szeregu testów numerycznych dokładności i wydajności takiego oprogramowania w macierzach rzadkich o różnej budowie oraz w przepływie przez układ o kształcie aorty brzusznej człowieka **[H-2]**.

Jednym z przeprowadzonych testów było mnożenie macierzy rzadkich pochodzących z różnych problemów fizycznych i technicznych, które wprowadzone zostały zarówno do pamięci GPU jak i CPU. Porównanie mnożenia macierzy przez wektor w obu przypadkach zostało pokazane na rys. 9.

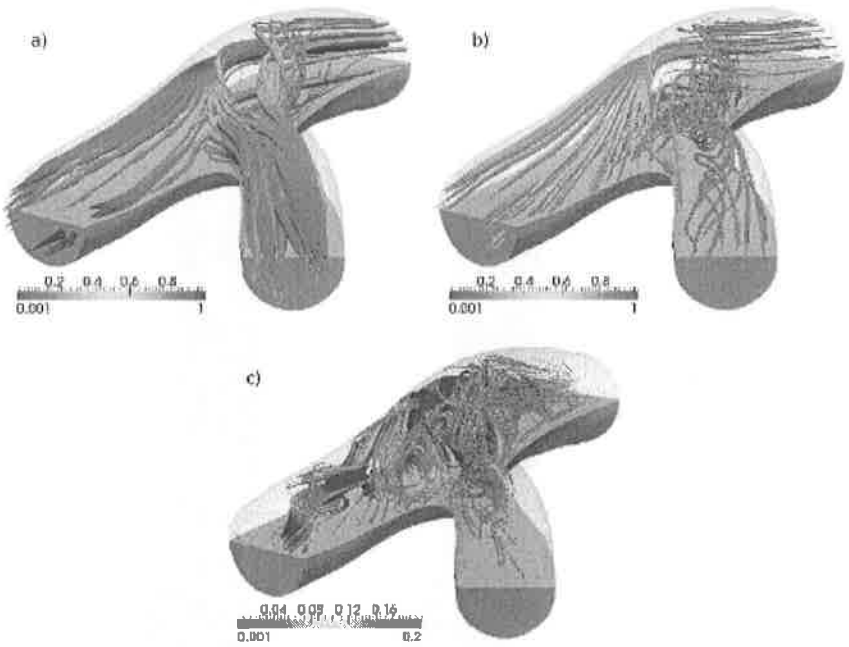


a) *b)*

Rys. 9. a) Porównanie przyspieszenia GPU względem CPU w mnożeniu macierzy rzadkich przez wektor na zbiorze danych ze standardowego źródła Florida Matrix Collection, eksperyment przeprowadzony dla pojedynczej i podwójnej precyzji. b) Przyspieszenie procedur rozszerzonych o procedury na GPU względem odpowiedników standardowych (CPU) w dwóch wariantach przygotowania układu do rozwiązania układów równań liniowych (preconditioners) **[H-2]**.

Głównym wynikiem tej pracy były przyspieszenia procedur wspartych przez GPU względem odpowiedników CPU (Rys. 9). Widać, że przyspieszenie to jest znaczne w przypadku przepływu potencjalnego i stacjonarnego (SIMPLE - Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations) w obu wariantach przygotowania solwerów (preconditioning). Niestety, przepływ niestacjonarny nie został znacznie przyspieszony, co uważaliśmy wtedy za wynik znacznych transferów między pamięcią CPU i GPU.

Moja praca w tym projekcie dotyczyła również wizualizacji obliczonych pól prędkości. Ze względu na ich charakter zdecydowałem się na wizualizacje z użyciem linii prądu zebranych w określonej chwili czasu (zjawiska były niestacjonarne). Przykładowe przepływy dla trzech różnych chwil czasu przedstawione są na Rys. 10.



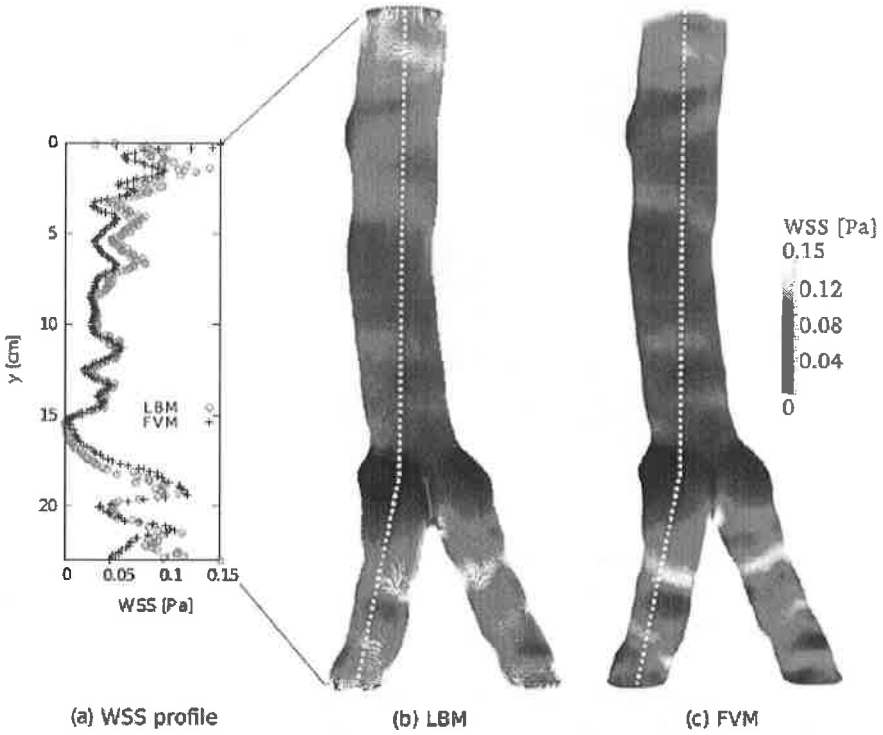
Rys. 10. Linie prądu dla trzech chwil czasu w przepływie pulsacyjnym przez aortę brzuszną człowieka. Na rys c) widać najbardziej burzliwy charakter przepływu. Więcej szczegółów dotyczących wyników znaleźć można w **[H-2]**.

Swoje badania nad ośrodkami o budowie biologicznej kontynuowałem w ramach projektu Zielony Transfer UM Wrocławia w latach 2011-2012. Owocem tej pracy jest artykuł **[H-4]**, w którym przeprowadziłem testy numeryczne metody Gazu Sieciowego Boltzmanna w aorcie brzusznej pochodzącej od prawdziwego pacjenta (dane zeskanowane z użyciem tomografii komputerowej).

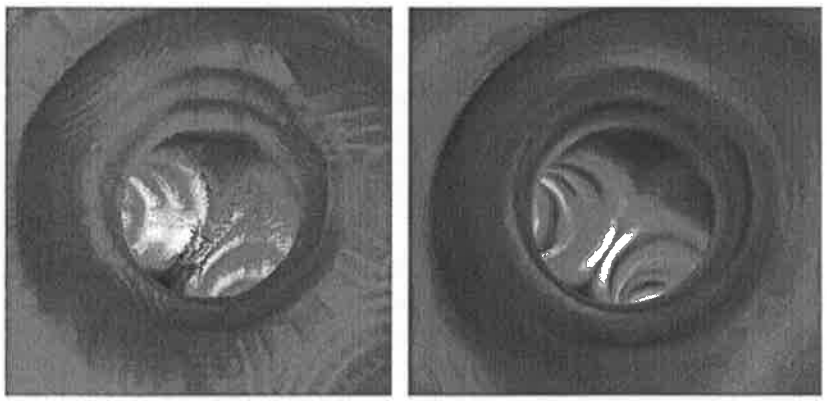
W tej części pracy podjąłem się usprawnienia procesu liczenia najważniejszej wielkości, z punktu widzenia analizy medycznej przepływu, czyli naprężenia stycznego na ściankach naczyniowych (wall shear stress - WSS). Wielkość ta, liczona standardowo w metodzie LBM jest obarczona dużymi błędami pochodzącymi głównie z niedokładności opisu brzegów (przybliżenie schodkowe). Moim wkładem był tu nowy pomysł na wyznaczenie normalnej do powierzchni, który w uproszczony sposób pozwolił na wyznaczenie gładkiego przebiegu normalnych, a co za tym idzie, w pewnym sensie wygładzić wynikowe wartości naprężeń.

Głównym celem tej części badań było przeprowadzenie testów numerycznych metody LBM (Gaz Sieciowy Boltzmanna) w porównaniu do metody objętości skończonych (FVM) w kontekście danych medycznych (o skomplikowanej, nieregularnej budowie). Przykładowe wyniki przedstawione zostały na Rys. 11 i 12, gdzie odłożony został m. in. profil WSS zdjęty z linii przerywanej wzdłuż całej aorty. Widać wyraźnie, że obie metody numeryczne liczą tą samą wielkość głównie w obrębie środka aorty. Niestety, nie udało się uzyskać pełnej zgodności przy wlocie i wylocie z naczynia, co najprawdopodobniej jest rezultatem trudności w dobraniu

spójnych warunków brzegowych dla obu metod, które pracują na innym typie danych.



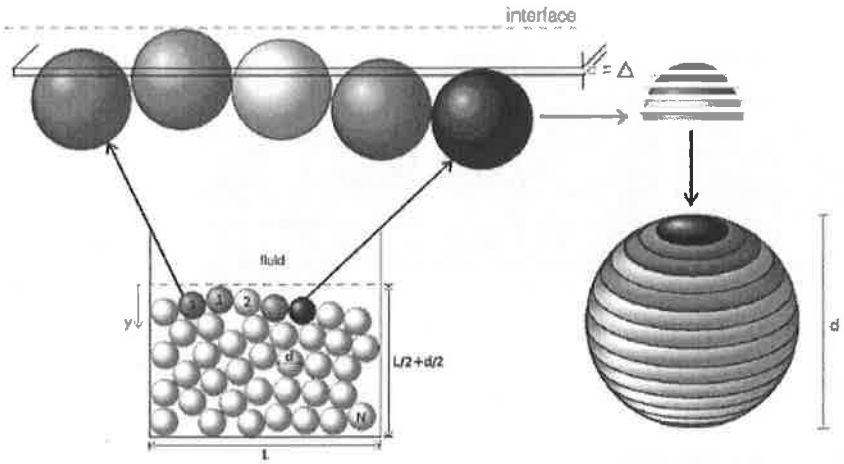
Rys. 11. Porównanie profili WSS zebranych przy powierzchni w postaci profilu wzdłuż linii przerywanych (a) oraz jako mapa kolorów w b) metodzie LBM (Palabos) oraz c) FVM (OpenFOAM) **[H-4]**.



Rys.12. Porównanie naprężeń WSS we wnętrzu aorty brzusznej w przypadku metody LBM (lewy) i FVM (prawy) **[H-4]**.

Struktura ośrodków o budowie ziarnistej
Praca wchodząca w skład tej części osiągnięcia naukowego **[H-6]**

Poprawna definicja i określenie podstawowych parametrów ośrodka porowatego (porowatość, krętość, przepuszczalność) jest kluczowa w badaniach nad transportem. Będąc uczestnikiem stażu podoktorskiego w Instytucie Maxa-Plancka w Bremen, zostałem postawiony przed zadaniem stworzenia teorii dotyczącej budowy powierzchni ośrodka zbudowanego z usypanych ziaren kształtu kulistego. Wiedza o tej budowie mogłaby dalej zostać użyta w teoretycznym opisie transportu dyfuzyjnego i hydrodynamicznego. Podjąłem się tego zadania i owocem jest teoria oparta o podział części interfejsu na infinityzemalne dyski (Rys. 1 za **[H-6]**).



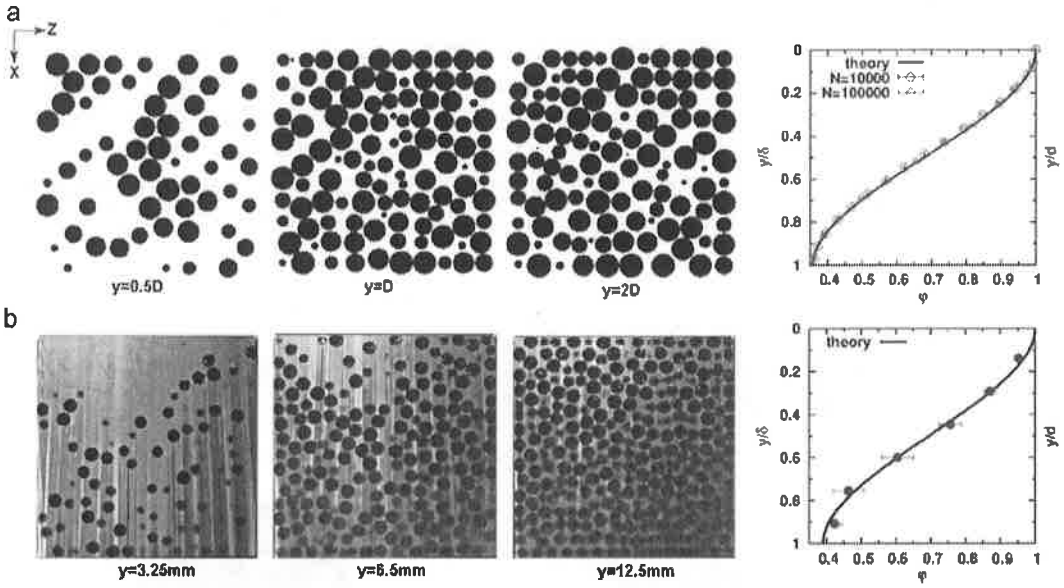
Rys. 13. Ilustracja teorii wg której objętość warstwy brzegowej pomiędzy płynem, a ośrodkiem zbudowanym z ziaren może zostać przybliżona przez objętość wycinka kuli zbudowanej z dysków wyciętych przez infinityzemalną warstwę z naszego ośrodka **[H-6]**.

Taka konstrukcja pozwala na wyznaczenie zależności porowatości od głębokości ośrodka φ(y), którą wyznaczyliśmy jako:

$$\varphi(y) = 1 - \frac{N}{L^3} V(y)$$

gdzie N jest ilością kul, L jest wymiarem liniowym naczynia, a V(y) jest objętością wycinka kuli o długości y. Równanie jest przeskalowane, tak, że D=1 (średnica kuli). Ta teoretyczna relacja została przez nas przebadana z użyciem układu kul szklanych upakowanych w kwadratowym naczyniu zarówno z użyciem eksperymentu i metodyki PIV (Particle Image Velocimetry) - przy czym nie interesowało nas tu pole prędkości, a stacjonarne zdjęcia przestrzeni porów, oraz numerycznie z użyciem metod zdarzeń dyskretnych [z użyciem kodów z pracy "Packing hard spheres in high dimensional Euclidean spaces", by M. Skoge, A. Donev, F. H. Stillinger, and S. Torquato, Phys. Rev. E, Vol. 74: 041127 (2006)].

Na Rys. 14 przedstawione zostały wyniki potwierdzające, że wprowadzony wzór teoretyczny dobrze oddaje charakter zależności porowatości od głębokości na powierzchni ośrodka porowatego. Jest to prawdziwe zarówno w badaniach nad układami upakowanymi numerycznie jak i doświadczalnie.



Rys. 14. Zależność porowatości od głębokości w układzie upakowanych ziaren w przypadku numerycznym (wiersz górny) jak i doświadczalnie z użyciem metod laserowych PIV do badania przekrojów (wiersz dolny) [H-6].

Funkcja rozkładu prędkości

Praca wchodząca w skład tej części osiągnięcia naukowego: **[H-7]**

Najnowszy kierunek w badaniach nad strukturą i transportem wyznacza praca nad metodologią badania transportu przez ośrodki porowate, w której zbadaliśmy pole prędkości w sposób statystyczny **[H-7]**. Zamiast patrzeć na pole prędkości w standardowy sposób, tzn. wyznaczając pole prędkości bądź linie prądu w przepływie, wyznaczyliśmy histogramy w przepływie, których cechy analizowaliśmy, wykorzystując dotychczasowe doświadczenia.

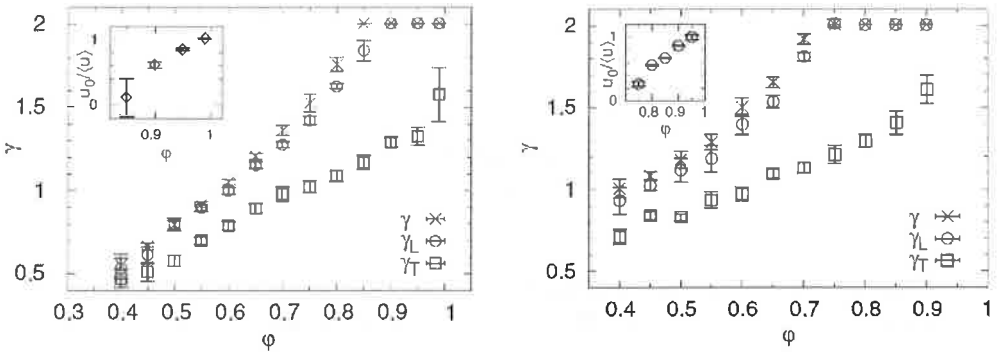
Układem podejmowanym w tej części jest najbardziej przebadany przez nas do tej pory układ pokrywających się przeszkód kwadratowych i sześciennych [**P-3**, **H-1**, **H-3, H-5, H-7, H-8**]. Do przepływów wykorzystaliśmy model gazu sieciowego Boltzmanna. Wprowadziliśmy uogólniony model histogramu pola prędkości, który parametryzowany jest dwoma współczynnikami: β i γ:

$$f_{\mathrm{L}}^{+}(u_{\mathrm{L}}/\langle u_{\mathrm{L}}\rangle) \propto (u_{\mathrm{L}}/\langle u_{\mathrm{L}}\rangle)^{\gamma-1}\exp[-\beta(u_{\mathrm{L}}/\langle u_{\mathrm{L}}\rangle)^{\gamma}]$$

i skoncentrowaliśmy się na zbadaniu zależności drugiego z nich (γ), którego znaczenie zostało podniesione m. in. w [Datta13]. Badaliśmy ww równanie w odniesieniu do wartości bezwzględnej jak i poszczególnych składowych pola prędkości. Wyznaczyliśmy punkt, dla którego histogram jest wykładniczy (okolice

porowatości φ=0.6). Jest to szczególnie interesujące w kontekście znalezionego przez nas minimum czasu relaksacji układu dla pokrywających się prostokątów wyznaczonego w roku 2008 w pierwszej pracy z tej tematyki (rys 5. z **[P-3]**). Wyniki takie sugerują jakąś specyficzną budowę geometryczną ośrodka dla tej porowatości. Ta hipoteza nie została jeszcze dokładnie zbadana. Wyniki dla układów dwu- i trójwymiarowych podsumowane zostały w formie wykresów na Rys. 16.

Rys. 15. Zależność funkcji rozkładu prędkości dla wartości bezwzględnej (górny rząd), składowej wzdłuż kierunku przepływu makroskopowego (środkowy rząd) i składowej poprzecznej) w przepływie przez układy o różnej porowatości (legenda w tytule wykresu). Wyraźna zależność współczynnika γ jest widoczna zarówno w funkcji porowatości jak i w odniesieniu do składowych **[H-7]**.



Rys. 16. Zależność współczynnika γ dla rozkładów w badanych układach w wersji dwuwymiarowej (lewy) i trójwymiarowej (prawy) **[H-7]**.

Literatura:

[Andrade99] J. S. Andrade et. al Phys. Rev. Lett. 82, 5249 (1999)

[Araújo06] Araújo AD et. al Phys Rev Lett. 29-97(13):138001, (2006)

[Berg13] Berg, S. et. al, PNAS 2013 110 (10) 3755-3759

[Dardis98] Dardis, O. et. al, Geophysical Research Letters 25 (9): 1471-1474 (1998)

[Datta13] Datta et. al, Phys. Rev. Lett. 111, 064501 (2013)

[Gao12] Gao, H. et. al., Intensive and extensive nitrogen loss from intertidal permeable sediments of the Wadden Sea Limnol. Oceanogr., 57(1), 185-198, (2012)

[Matyka14] Matyka, M. et. al. Proc. of the 5th International Conference on Porous Media and Their Applications in Science, Engineering and Industry ICPM5 (2014)

[Nouguchi05] Noguchi, H. et. al, PNAS 102, 14159–14164 (2005)

[Zacarias05] G.D. Zacarias et. al, J.Theor. Biol., Vol. 233(2), 245–251, 2005

[Zhao16] Zhao, J. et al., Sci. Rep. 6, 32393; doi: 10.1038/sreP-32393 (2016)

7. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo - badawczych

Lista pozostałych publikacji naukowych

P-1 Matyka, M. and Koza, Z., Spreading of a density front in the Kuentz-Lavallee model of porous media, J. Phys. D: Appl. Phys. 40, 4078-4083 (2007)

P-2 Matyka, K., Matyka, M., Mroz, I., Zalewska-Rejdak, J., and Ciszewski, A., An AFM study on mechanical properties of native and dimethyl suberimidate cross-linked pericardium tissue, Journal of Molecular Recognition 20(6), 524-530 (2007)

P-3 Matyka, M., Khalili, A. and Koza, Z., Tortuosity-porosity relation in the porous media flow, Phys. Rev. E 78, 026306 (2008)

P-4 Gao, H., Matyka, M., Liu, B., Khalili, A., Kostka, J.E., Collins, G., Jansen, S., Holtappels, M., Jensen, M.M., Badewien, T.H., Beck, M., Grunwald, M., de Beer, D., Lavik, G., Kuypers, M.M.M. Intensive and extensive nitrogen loss from intertidal permeable sediments of the Wadden Sea Limnol. Oceanogr., 57(1), 185- 198, (2012)

P-5 Tomczak, T., Zadarnowska, K., Koza, Z., Matyka, M., Miroslaw, L., Acceleration of Iterative Navier-Stokes Solvers on Graphics Processing Units, Int. J. Comp. Fluid Dyn., Vol. 27(4-5) (2013)

P-6 Koza, Z., Matyka, M., Szkoda, S., Miroslaw, L., Compressed Multirow Storage Format, SIAM J. Sci. Comput., 36-2, C219-C239 (2014)

P-7 Matyka, M., Symulacje Komputerowe w Fizyce, Helion, Gliwice (2002)

P-8 Matyka, M. and Ollila, M., A pressure model for soft body simulation, Proc. of Sigard (2003)

P-9 Z. Koza, M. Matyka, L. Miroslaw, J. Pola, Sparse Matrix-Vector Product, Numerical Computations with GPUs, ed. Volodymyr Kindratenko, Springer 2014

P-10 Matyka, M., Inverse Dynamic Displacement Constraints in Real-Time Cloth and Soft Body Models, in: Graphics Programming Methods, Charles River, USA (2004)

P-11 Matyka, M., Practical Animation of Soft Bodies for Game Development. The PSB Model, in: Game Programming Gems 5, Charles River, USA (2005)

P-12 A. Khalili, B. Liu, K.Javadi, M. R. Morad, Matyka, M., R.Stocker, Z. Koza, Application of porous media theories in marine biological modeling, Porous media:applications in biological systems and biotechnology. ed. by K. Vafai, Boca Raton : CRC Press Taylor & Francis, 2010.

P-13 Matyka, M., Miroslaw, L., Koza,Z., Performance of open source implementations of the Lattice Boltzmann methods on CPU and GPU (polish), The computer-aided scientific research (KOWBAN) XVIII (2011)

P-14 Koza, Z., Matyka, M., Szkoda, S., Miroslaw, L., Pola, J., Application of GPGPU technology to computational science (polish), The computer-aided scientific research (KOWBAN) XVIII (2011)

P-15 M. Matyka, J. Golembiewski, Z. Koza, The velocity distribution in a random porous medium Proc. of the 5th International Conference on Porous Media and Their Applications in Science, Engineering and Industry (2014)

P-16 W. Sobieski, S. Lipiński, W. Dudda, A. Trykozko, M. Marek, J. Wiącek, M. Matyka, J. Gołembiewski, Granularne ośrodki porowate, Katedra Mechaniki i Podstaw konstrukcji maszyn, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski, Olsztyn 2016

P-17 Modrzejewska, Z., Stawczyk, J., Matyka, K., Matyka, M., Mroz, I. and Ciszewski, A., Surface Microstructure of Chitosan Membranes - AFM Investigations Polish Journal of Enviromental Studies 15, 4A (2006)

P-18 Maciej Matyka, Mariusz Mądrala, Granica laminarnego przepływu wody w obsypce żwirowej studni eksploatacyjnej, praca zaakceptowana do publikacji w ramach konferencji WPH2017 (Współczesne Problemy Hydrogeologii)

Symulacje komputerowe [P-7]

Pierwszą z opublikowanych przeze mnie pozycją jest książka „Symulacje Komputerowe w Fizyce" **[P-7]**, w której prezentuję kilka modeli symulacji zahaczających o szereg zagadnień z fizyki – od modeli ciał miękkich (tkanin), przez modelowanie zjawisk nieliniowych (fale, płyny) po mechanikę kwantową i ewolucję paczki falowej. Jest to pozycja, która nie była pisana z myślą o wynikach stricte naukowych, jednak metody których tam używałem i zagadnienia, które opisałem

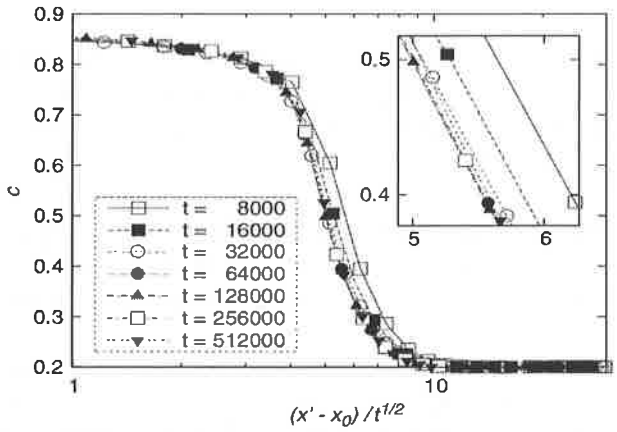
zostały w niektórych kierunkach rozwinięte i kontynuowane (ciała miękkie, płyny i ośrodki porowate).

Transport płynów, ośrodki porowate, model gazu sieciowego Boltzmanna [P-1, P-3, P-12, P-15, P-16]

Studia nad transportem w ośrodkach porowatych rozpocząłem od zbadania właściwości modelu gazu sieciowego, który rozszerzyłem o rozpraszacze w celu symulacji zjawiska transportu płynu w ośrodku porowatym **[P-1]**. Na gruncie badań numerycznych udało się pokazać m. in., że prędkość frontu zwilżania w naszym modelu jest proporcjonalna do gradientu koncentracji oraz stałej dyfuzji wg wzoru:

$$v_x \propto D\nabla c$$

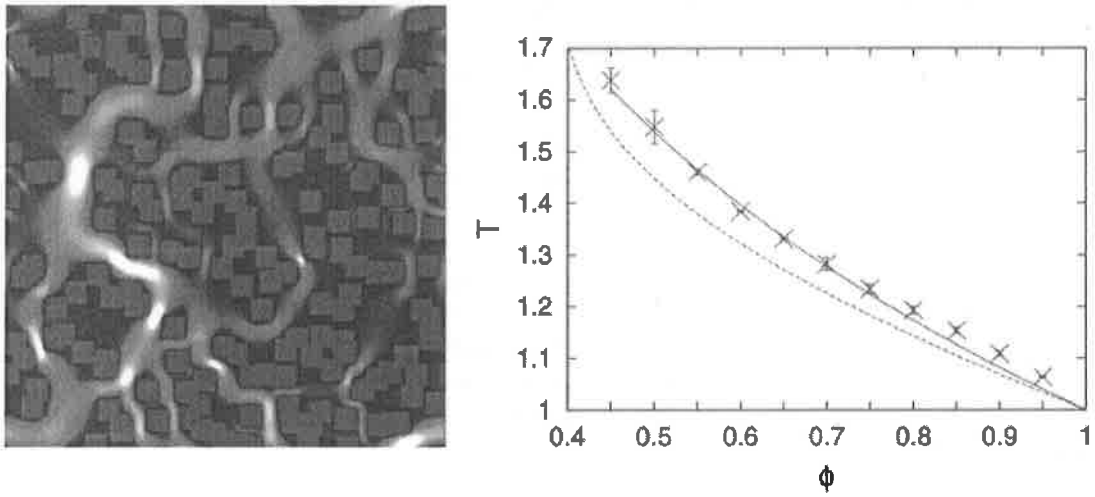
Wyniki numeryczne sugerują również, że w układzie występuje normalna, klasyczna dyfuzja z dryfem (w odróżnieniu od anomalnej dyfuzji, która była użyta do opisu tego zjawiska we wcześniejszych badaniach). Na przykład na rysunku poniżej widać wykres profilu koncentracji zebranego w kilku chwilach czasu w ruchomym układzie odniesienia (ruch z prędkością frontu). Tak pokazane profile skalują się z klasycznym wykładnikiem ½, co potwierdza hipotezę o klasycznej dyfuzji.



*Rys. 17. Skalowanie profilu koncentracji w różnych chwilach czasu w ruchomym układzie odniesienia **[P-1]**.*

W kolejnym kroku swoje zainteresowania przeniosłem w stronę transportu hydrodynamicznego. Opracowałem kody komputerowe i zaimplementowałem metodę gazu sieciowego Boltzmanna do zbadania krętości w ośrodkach porowatych o losowej budowie **[P-3]**. Pracę wykonywałem w ramach swojej pracy doktorskiej na Uniwersytecie Wrocławskim oraz w Instytucie Maxa-Plancka w Bremie (współpraca z prof. Arzhangiem Khalili). W pracy wykonałem szereg symulacji przepływu przez różne konfiguracje ośrodków losowych. Pokazałem, że można uprościć równania i

procedury numeryczne odpowiednio przygotowując linie prądu (zachowując warunek stałego strumienia pomiędzy nimi). Korzystając z tak przygotowanych danych wyznaczyłem numerycznie relację T(φ).



Rys. 18. (lewy) Pole prędkości (wartość bezwzględna) w przepływie przez losowy ośrodek porowaty. (prawy) Zależność T(φ) wyznaczona numerycznie i dopasowana (linia ciągła) do funkcji T(φ)=1-p log(φ), gdzie p jest wolnym parametrem fitowania ***[P-3]****. Linia przerywana to dane z innej publikacji, które jak pokazaliśmy – niezbyt dobrze reprezentują wyniki numeryczne.*

Najlepszym przybliżeniem dla tej relacji był wzór logarytmiczny, jednak w pracy ujęliśmy nasze dane w szerszym kontekście prezentując dopasowanie do kilku relacji empirycznych na T(φ). Wniosek z naszej pracy to brak jednej i jedynie słusznej funkcji opisujących tę zależność. Ciekawym wynikiem była zbieżność procedury numerycznej w czasie, która posiadała minimum dla określonej wartości porowatości φ=0.6, co sugeruje że układ ma tam jakąś specyficzną budowę. Nie przebadaliśmy tego dokładniej i problem rozwiązania tego minimum pozostaje niezbadany. Praca **[P-3]** stała się popularna nie tylko w środowisku ośrodków porowatych uzyskując **102** cytowania wg Web of Science (bez moich samocytowań) i **188** cytowań wg Google Scholar (czerwiec 2017). Prace nad krętością zostały rozwinięte w kierunku badań nad anizotropią (główny nurt prac do habilitacji) oraz prezentowane na kilku konferencjach międzynarodowych. Większą część swoich badań nad krętością omówiłem w ramach rozdziału w książce opublikowanej w roku 2010 **[P-12]**.

Badania nad ośrodkami losowymi były kontynuowane również w kierunku rozkładów prędkości, które przebadaliśmy wspólnie z J. Gołembiewskim dla którego jestem opiekunem pomocniczym. Wyniki, czyli funkcje rozkładu prędkości dla losowych ośrodków porowatych zaprezentowałem na konferencji **[P-15]**. Badania rozszerzone o analizę tych rozkładów zostały następnie opublikowane w PRE (praca **[H-7]** włączona do cyklu).

Istotnie różniącą się częścią mojej pracy nad ośrodkami porowatymi były badania nad denitryfikacją przeprowadzone w trakcie pobytu na stażu Post-Doc w instytucie Maxa-Plancka w Bremie [P-4[. W tej pracy zostałem zaangażowany do stworzenia modelu matematycznego (numerycznego) zjawiska transportu zawiesiny w płynie przepływającym wokoło zmarszczek (ang. ripples) na piaszczystym dnie morskim. Do tego celu opracowaliśmy (wspólnie z Bo Liu) model gazu sieciowego Boltzmanna, który nie uwzględniał budowy mikroskopowej dna morskiego, a traktował go jak jednorodny ośrodek porowaty. Dzięki temu byliśmy w stanie przeprowadzić szereg symulacji z uwzględnieniem dużego, makroskopowego modelu dna morskiego. Wykazaliśmy, że adwekcja i prądy morskie występujące nad dnem morskim mają istotny wpływ na zjawisko transportu w głąb dna morskiego co ma znaczący wpływ na zjawisko denitryfikacji **[P-4]**.

Swoją pracę nad ośrodkami porowatymi kontynuuję do dzisiaj, a podstawowym narzędziem jest model gazu sieciowego Boltzmanna. Swoje doświadczenia z modelem, podstawy jego implementacji oraz teorii opisałem w ramach przygotowań do konferencji w Olsztynie (2016), gdzie zaprezentowałem wykład o tej metodzie oraz przygotowałem (we współpracy z doktorantem J. Gołembiewskim) rozdział do monografii **[P-16]**.

Obliczenia GPGPU (Graphics Processing Units) [P-5, P-6, P-9, P-13, P-14]

W swojej pracy spotykałem się często z problemem prędkości obliczeń. Duża ilość układów, które należało zbadać w rozsądnym czasie wymagała nawet użycia serwerów obliczeniowych lub superkomputerów (tu wspierałem się infrastrukturą PL-GRID). W pewnym momencie mojej pracy na rynku pojawiły się specjalizowane procesory graficzne, które do tej pory były używane głównie w grach komputerowych. Okazało się jednak, że można ich użyć do obliczeń naukowych, a jednym z powodów mojego zainteresowania tym tematem było opublikowanie biblioteki CUDA przez firmę nVidia, która bardzo wspierała proces powstawania takiego oprogramowania **[P-14]**.

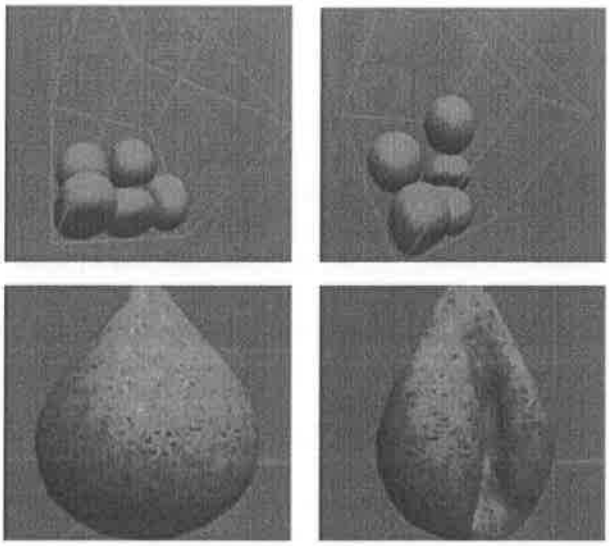
Jedną z pierwszych prac opublikowałem wspólnie ze współpracownikami z Politechniki Wrocławskiej i jest ona zawarta w cyklu habilitacyjnym **[H-2]**. Prace nad procedurami GPU kontynuowałem w ramach **[P-5]**, gdzie współtworzyłem format zapisu macierzy rzadkich użyty później do opracowania procedur wydajnego mnożenia macierzy przez wektor. Takie mnożenie jest jedną z podstawowych operacji wykonywanych w tzw. solwerach równań nieliniowych (solwerach płynów). Ich przyspieszenie przyspiesza cały solwer, czyli też symulacje przeprowadzane są szybciej. W artykule **[P-5]** prezentujemy wydajność solwerów płynów z biblioteki OpenFOAM, do których zostały podpięte procedury mnożenia na GPU. Uzyskaliśmy kilkukrotne przyspieszenie dla dużych układów, zauważyliśmy, że istotną rolę odgrywają transfery do i z pamięci CPU czyli tzw. wąskie gardło magistrali PCI. Wnioskiem jest tu potrzeba przenoszenia do GPU całych algorytmów tak, aby dane nie były przenoszone między procesorami.
Praca nie polegała jedynie na zbadaniu wydajności solwerów, przygotowane zostały też przypadki testowe, które potwierdzały poprawność rozwiązania na GPU, tj. driven

cavity, Poiseuille flow oraz przepływ przez naczynia krwionośne. Wszystkie testy potwierdziły poprawność naszych solwerów dla GPU.

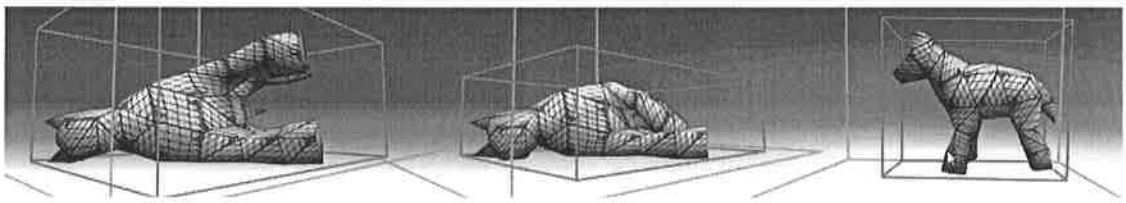
Kolejnym krokiem było opracowanie wydajnego algorytmu mnożenia macierzy rzadkich przez wektor, czyli de facto nowego formatu zapisu macierzy rzadkich **[P-6]**. Tu moja praca polegała na wsparciu głównego autora pomysłu i algorytmu (Z. Koza), zarówno w procesie przygotowywania kernela dla GPU jak i pisania i opisywania algorytmu. W pracy udało się wykazać, że dla pewnej klasy macierzy rzadkich wykorzystanie algorytmu CMRS daje przyspieszenie, dla niektórych algorytm powoduje spowolnienie działania. Jest to jedna z wielu prac w tej dziedzinie w której próbuje się wprowadzić nowe schematy na przechowywanie rzadkich danych. Jest to temat popularny i potrzebny dla praktyków, dlatego zdecydowaliśmy się dokonać szerszego opisu przeglądowego dostępnych formatów opisu w formie rozdziału w książce o metodach numerycznych na GPU **[P-9]**. Podsumowanie prac i badań w naszym zespole zostało również ujęte w dwóch pracach konferencyjnych, gdzie przedstawiliśmy zarówno szersze tło dotyczące technologii GPU i aplikacji w fizyce i nauce ogólnie **[P-14]** jak i badania nad wydajnością GPU i porównanie do klasycznego CPU w podstawowych problemach hydrodynamicznych z użyciem metody gazu sieciowego Boltzmanna **[P-13]**.

Model ciał miękkich [P-8,P-10,P-11,P-12]

Moje zainteresowania naukowe obejmują również dziedzinę grafiki komputerowej, dokładniej animację i generowanie ruchu ciał miękkich na podstawie modelowania komputerowego. W celu wykonania takiej animacji jeszcze w trakcie studiów magisterskich (w trakcie wyjazdu z programu ERASMUS/SOCRATES) opracowałem model ciał miękkich oparty o równanie stanu gazu doskonałego. Model ma bardzo proste podstawy – ciało zbudowane jest z punktów połączonych sprężyście (siła sprężystości Hooke'a), punkty umieszczone są na powierzchni obiektu. Aby model się nie zapadł dołożona jest siła, która działa zawsze w kierunku normalnej do powierzchni obiektu (czyli siła od różnicy ciśnień między wnętrzem ciała, a ciśnieniem atmosferycznym).



Rys. 19. Model ciał miękkich z ciśnieniem w różnych konfiguracjach. Rysunek przedstawia zrzut z ekranu działającej aplikacji (aplikacja w czasie rzeczywistym). Górny wiersz to kilka ciał umieszczonych w jednym pudełku z kolizjami, dolny wiersz to duże (lewy) i małe ciśnienie (prawy) dla ciała zawieszonego za jeden punkt.



Rys. 20 Działanie modelu ciał miękkich w zastosowaniu do animacji komputerowej postaci psa. Model trójwymiarowy siatki reprezentującej postać został wykonany przez Barnabę Mikułowskiego z Akademii Sztuk Pięknych we Wrocławiu, z którym rozpocząłem współpracę. Wspólnie zgłosiliśmy kurs modelowania ciał miękkich w ramach konferencji SIGGRAPH ASIA 2017 (aktualnie w recenzji).

Dzięki temu model zachowuje kształt, można go deformować, ale zawsze wraca do oryginalnego kształtu. Swoją pracę nad modelem od początku opisałem w kilku publikacjach zarówno konferencyjnej **[P-8]** jak i książkowych dotyczących programowania gier i grafiki komputerowej **[P-10,P-11]**. Wystąpiłem również na konferencji dotyczącej edukacji w fizyce, gdzie prezentowałem model w kontekście prostego modelu reprezentującego dość złożone zjawisko [Maciej Matyka, 2007, The Pressure Soft Body a Simple Model of Complex Behavior, 12th International Conference on Multimedia in Physics Teaching and Learning, Wroclaw, Poland, September].

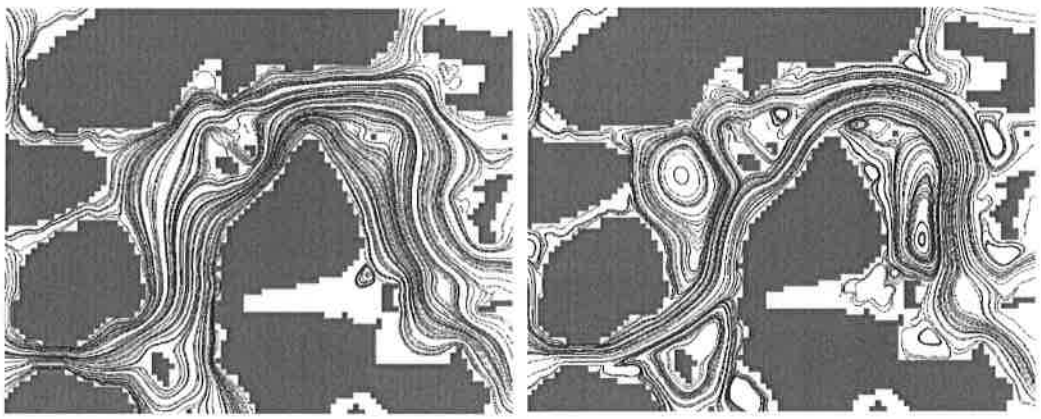
Mikroskopia sił atomowych [P-2,P-17]

Umiejętność implementacji różnych algorytmów pozwoliła mi wesprzeć zespół z naszego Instytutu Doświadczalnego w którym w latach 2006-2008 prowadzone były badania nad próbkami biologicznymi z wykorzystaniem Mikroskopii Sił Atomowych AFM. Pomogłem opracować teoretycznie i wyznaczyć numerycznie parametr związany z polem powierzchnio badanych próbek. Do jego zbadania napisałem program i pozwoliło to na przygotowanie wykresu bezwymiarowego parametru λ (stosunek powierzchni badanego obszaru do powierzchni fizycznej próbki) dla trzech różnych próbek **[P-17]**.

Kolejnym etapem badań nad próbkami biologicznymi było eksperymentalne zbadanie krzywych siłowych. Moja praca polegała na wsparciu programistycznym procesu analizy, który był bardzo żmudny. Napisałem program w języku Python, który służył do analizy półautomatycznej krzywych siłowych i pozwolił na znaczne przyspieszenie pracy oraz przeprowadzenie statystyki na większej ilości danych **[P-2]**.

Badania studni eksploatacyjnych [P-18]

Mój najnowszy projekt dotyczy przepływów nielaminarnych I badań nad studniami ekploatacyjnymi, a dokładniej nad rolą prędkości przepływu i budowy obsypki studni w skali mikroskopowej na zachowanie makroskopowe (np. przepuszczalność). Wspólnie ze współautorem opracowałem koncepcję na użycie nowego kryterium na laminarność przepływu (liczba π – tzw. participation number) w układach rzeczywistych. Wcześniej takie kryterium było stosowane tylko w przepływach przez sztuczne, losowo generowane układy [Andrade, Jr. J. S. i in. 1999, Inertial Effects on Fluid Flow through Disordered Porous Media, Phys. Rev. Lett., 82, 5249.]). Nam udało się pokazać zmienność tego parametru w zależności od zmian warunków (prędkości) przepływu.



*Rys. 21 Linie prądu w przepływie przez fragment obsypki żwirowej (wybrane fragmenty) dla liczb Reynoldsa Re=1 (lewy) i dla Re=25 (prawy). Dla Re=25 wyraźnie wytwrzyły się struktury wirowe wytworzone w procesie przepływu **[P-18]**.*

Maciej Matyka